

平成 22 年 5 月 1 日現在

研究種目： 基盤研究(B)  
 研究期間： 2007 ～ 2009  
 課題番号： 19360048  
 研究課題名（和文） ひずみこう配塑性理論に基づく結晶粒微細化効果の解析的予測と均質化解析  
 研究課題名（英文） Analytical prediction and homogenization analysis of grain fining effects using a strain gradient plasticity theory  
 研究代表者  
 大野 信忠 (OHNO NOBUTADA)  
 名古屋大学・大学院工学研究科・教授  
 研究者番号： 30115539

研究成果の概要（和文）：結晶粒の微細化による降伏応力の増加は、Hall-Petch の関係として実験的によく知られている。しかし、サブ $\mu\text{m}$ ～数 $\mu\text{m}$ の粒径範囲では、降伏応力の粒径依存性はHall-Petch の関係より強くなると報告されている。そこで本研究では、転位の自己エネルギーをひずみこう配塑性理論に組み込んで降伏応力の粒径依存性を解析的に予測し、実験結果との比較を行った。さらに、転位の自己エネルギーを考慮した陰的均質化解析の方法を開発した。

研究成果の概要（英文）：The increase of yield stress due to grain fining is experimentally well-known as the Hall-Petch relation. It has been, however, reported that the grain size dependence of yield stress in the submicron to several-micron range of grain sizes is stronger than that in the Hall-Petch relation. In this study, by implementing the self-energy of dislocations in a strain gradient plasticity theory, the grain size dependence of yield stress is analytically estimated, and the resulting prediction is examined using experimental data. Then, an implicit method of homogenization analysis is developed by taking account of the self energy of dislocations.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	7,600,000	2,280,000	9,880,000
2008 年度	3,500,000	1,050,000	4,550,000
2009 年度	1,700,000	510,000	2,210,000
年度			
年度			
総計	12,800,000	3,840,000	16,640,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：GN転位，高次応力，多結晶体，降伏応力，粒径依存性

## 1. 研究開始当初の背景

結晶粒の微細化による降伏応力の増加は、Hall-Petch の関係として実験的によく知られており、多結晶金属の有力な強化方法として国内外で盛んに研究されている。しかし、粒径がサブ $\mu\text{m}$ ～数 $\mu\text{m}$ 程度に減少すると、初期

降伏応力の粒径依存性は Hall-Petch の関係より強くなると報告されている。また、微細粒金属は明らかな初期降伏点を示すことが、いくつかの金属で観察されている。このような降伏挙動の物理機構の理解は、結晶粒の微細化による強化の程度を把握するために大

変重要であるが、不明な点が多い。

上に述べた降伏応力の粒径依存性は、金属の塑性変形における寸法効果の一例である。このような寸法効果は、古典塑性理論ではまったく表されないから、ひずみこう配塑性理論が多くの研究者により提案されており、我が国でも研究が進んでいる。このうち Gurtin の理論は、単結晶金属中のすべりこう配を考慮した非局所結晶塑性理論であり、粒界でのすべり拘束を陽に表現できるから、降伏応力の粒径依存性の検討に適した理論であると考えられる。

しかし、Gurtin の理論を用いて多結晶金属における塑性変形挙動の粒径依存性を解析しても、初期降伏応力はほとんど変化せず、実験結果の傾向はまったく再現されなかった。他のひずみこう配塑性理論を用いた解析でも、粒径減少に伴う初期降伏応力の増加はほとんど得られておらず、大きな問題点となっていた。

## 2. 研究の目的

本研究では、これまでのひずみこう配塑性理論では考慮されていない物理的因子として“GN 転位の自己エネルギー”に着目する。GN 転位とは、すべりこう配部分に幾何学的必要性により存在する転位である。粒界近傍では、すべりこう配により GN 転位が生じるが、初期降伏の瞬間では GN 転位の密度が低いため GN 転位間の相互作用は無視できる。この結果、GN 転位の自己エネルギーが初期降伏応力の粒径依存性に大きく影響すると考えられる。

そこで本研究では、まず、GN 転位の自己エネルギーを Gurtin の理論に組み込み、初期降伏応力の粒径依存性に関する予測式を導く。次に、研究背景で述べたサブ $\mu\text{m}$ ～数 $\mu\text{m}$ の粒径範囲を中心に予測式の妥当性を実験結果との比較により調べる。さらに、導いた予測式の精度を調べるため、転位の自己エネルギーを考慮した陰的均質化解析の方法を開発し、結晶粒の有限要素解析を行う。

## 3. 研究の方法

(1) すべりこう配による自由エネルギーとして GN 転位の自己エネルギーを考え、すべりこう配の仕事共役としての高次応力を導出する。この高次応力を Gurtin の非局所結晶塑性理論に組み込むことで、GN 転位の自己エネルギーを考慮したすべりこう配理論の構築を行う。

(2) 上述のすべりこう配理論を 2 次元および 3 次元モデル結晶粒に適用し、降伏応力の粒径依存性に関する予測式を解析解の形で導く。なお、この予測式には粒間相互作用の効果が含まれないから、その効果を Taylor 因子により考慮する。

(3) 初期降伏応力の粒径依存性に関する実験データを文献で調査し、予測式の妥当性を調べる。文献調査は、サブ $\mu\text{m}$ ～数 $\mu\text{m}$ の粒径範囲を中心に行う。

(4) GN 転位の自己エネルギーを考慮した Gurtin の非局所結晶塑性理論により結晶粒の有限要素解析を行うため、有限要素方程式を導く。その際、計算効率の向上を図るため、陰解法に基づいて、支配方程式の有限要素離散化を行う。

(5) 導出した有限要素方程式を結晶粒に適用し、初期降伏応力の粒径依存性を数値的に調べる。これに基づいて解析的予測式の精度を検討する。なお、解析は六角形結晶粒について行い、すべりは粒界で完全に拘束されるとする。

## 4. 研究成果

(1) 転位の単位長さ当たりの自己エネルギーは  $E_0 = a\mu b^2$  と表される。ここで、 $a$  は係数、 $\mu$  は横弾性係数、 $b$  はバーガースペクトルの大きさである。したがって、単位体積当たりの GN 転位の自由エネルギーは、

$$\psi = \sum_{\beta=1}^N E_0 \rho_G^{(\beta)} \quad (1)$$

と書ける。ここで  $\rho_G^{(\beta)}$  は、すべり系  $\beta$  における GN 転位密度を示し、 $N$  はすべり系の総数である。上式を用いてすべりこう配の仕事共役として高次応力  $\xi^{(\beta)}$  を求め、Gurtin の結晶塑性降伏条件に代入することで、2 次元および 3 次元モデル結晶粒の降伏応力を解析的に評価した。その際、粒界ではすべりは完全に拘束されるとした。この結果、平均粒径  $D$  の多結晶金属が引張負荷を受ける場合の初期降伏応力  $\Sigma_y$  が次式のように解析的に予測された。

$$\Sigma_y \approx M \left( k_0 + \Theta \frac{a\mu b}{D} \right) \quad (2)$$

ここで、 $M$  は結晶粒間の相互作用を表す係数 (Taylor 因子) であり、 $M \approx 3$  であることが知られている。また、 $k_0$  は単結晶ですべりの開始するせん断応力を示し、臨界分解せん断応力と呼ばれる。さらに、 $\Theta$  は結晶粒の形状に依存する係数であり、球状および 14 面体モデル結晶粒を解析したところ  $\Theta \approx 5$  と求められた。

(2) 初期降伏応力  $\Sigma_y$  の予測式 (2) の妥当性を検討するため、公表されている実験データとの比較を行ったところ、図 1 に示す結果が得られた。この比較では、予測式 (2) の係数  $a$  は、転位ループ (直径  $D$ ) の自己エネルギーに基づいて  $a = 0.10 \ln(6.5 \times 10^3 D)$  とした。図 1 の縦軸中の初期降伏応力  $\Sigma_y$  は、実験結果では 0.2% 耐力あるいは 0.5% 耐力である。また  $\Sigma_0 (= Mk_0)$  は、粒径  $D$  が十分に大きい場合の初期降伏応力である。

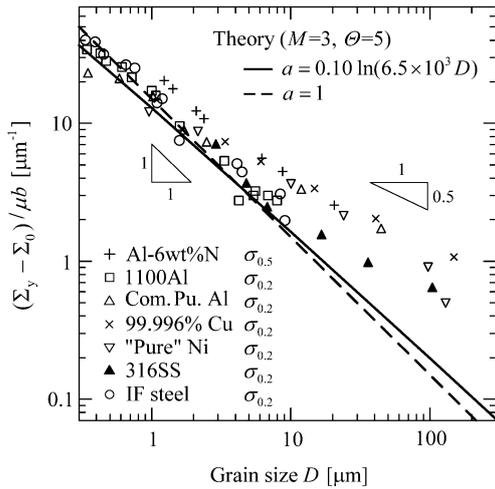


図1 初期降伏応力の粒径依存性に関する予測結果と実験結果の比較

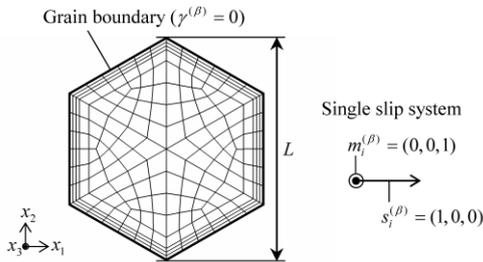


図2 単一すべり系を有する六角形結晶粒の形状と要素分割

図1を見ると、サブ $\mu\text{m}$ ～数 $\mu\text{m}$ の粒径範囲では、予測式(1)は実験結果とかなりよく一致しており、したがって初期降伏応力 $\Sigma_y$ は粒径 $D$ に逆比例する傾向にあることがわかる。ただし、粒径 $D$ が数 $\mu\text{m}$ 以上になると、初期降伏応力 $\Sigma_y$ は $D^{1/2}$ に逆比例する傾向にあり、いわゆるHall-Petchの関係がほぼ成り立つことがわかる。

(3) GN転位の自由エネルギー式(1)に基づくGurtinのすべりこう配理論を陰解法に基づいて有限要素離散化し、周期配列した六角形結晶粒の有限要素解析を行った。結晶粒は、図2に示すように一つのすべり系を有し、巨視的せん断ひずみ $E_{31}$ を受けるとした。結晶粒の大きさ $L$ は、 $1\mu\text{m}$ 、 $5\mu\text{m}$ 、 $100\mu\text{m}$ の3通りとし、材料パラメータには銅の代表的値を用いた。この結果、巨視的降伏応力 $\Sigma_y$ は、図3に○印で示すように $L$ の増加とともに減少した。この図には、本研究で導いた予測式

$$\Sigma_y = \kappa_0 \frac{8a\mu b}{\sqrt{3}} \quad (3)$$

の結果も実線で記入されており、有限要素解析の結果と大変よく一致していることがわ

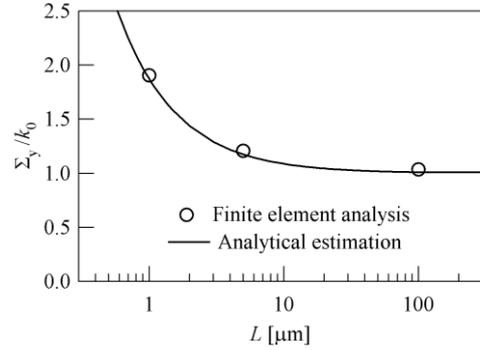


図3 六角形結晶粒が巨視的せん断ひずみ $E_{31}$ を受ける場合の巨視的降伏応力と粒径 $L$ の関係

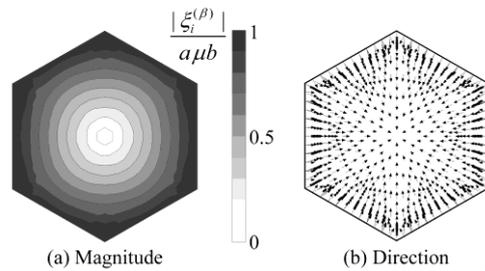


図4 六角形結晶粒内での高次応力 $\xi^{(\beta)}$ の大きさと方向の分布

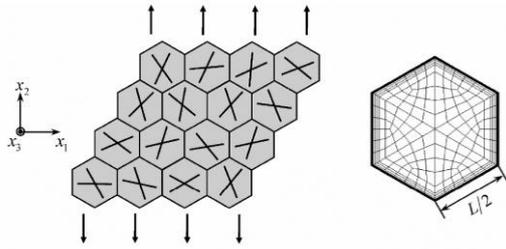
かる。図4(a), (b)は、上述の解析により得られた高次応力 $\xi^{(\beta)}$ の大きさと方向の分布を示しており、中心部では、円形結晶粒の場合の解析の結果と一致した結果が得られている。

(4) GN転位の自由エネルギー式(1)をGurtinのすべりこう配理論に適用し、図5(a)に示すような2次元モデル多結晶が $x_2$ 方向に単軸負荷を受ける場合を解析した。各結晶粒は図5(b)のように要素分割した。この結果、逆負荷のもとでの巨視的応力-ひずみ曲線が異常な形となった(図6(a))。そこで、GN転位の累積密度 $\bar{\rho}_G^{(\beta)}$ を導入し、式(1)を

$$\psi = \sum_{\beta=1}^N E_0 \bar{\rho}_G^{(\beta)} \quad (4)$$

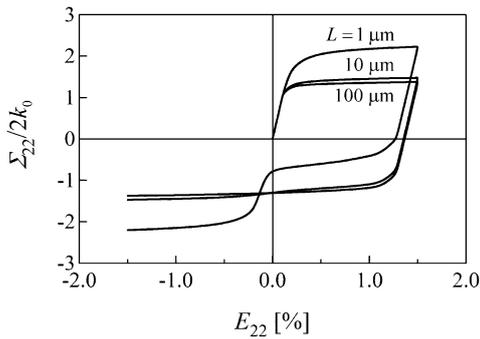
と修正したところ、巨視的応力-ひずみ曲線は図6(b)に示すように通常観察される形となった。このことから、逆負荷の場合にはGN転位の累積密度 $\bar{\rho}_G^{(\beta)}$ を考えるの必要があると言える。

本研究の成果は、国際会議でのPlenary LectureやKeynote Lectureとして発表し、大変注目された。本研究では、転位間の相互作用を簡単のため無視したが、今後このような相互作用を考慮した研究が発展すると予想される。

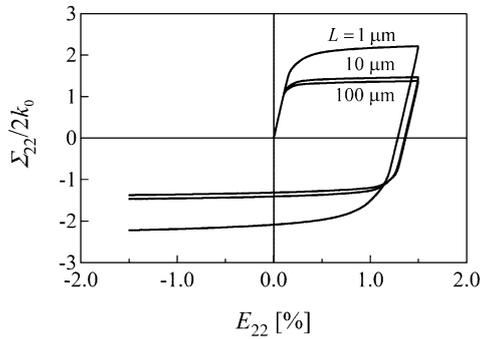


(a) 2次元多結晶モデル (b) 各結晶粒の要素分割

図5 二重すべり系を有する六角形結晶粒からなる2次元多結晶モデル



(a) 式(1)に基づく場合



(b) 式(4)に基づく場合

図6 単軸負荷を受ける2次元多結晶モデルの巨視的応力-ひずみ曲線

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計4件)

- ① 小寺一樹, 亀谷隆信, 奥村 大, 大野信忠, 幾何学的に必要な転位の自己エネルギーを考慮したひずみこう配結晶塑性理論のための陰的有限要素方程式, 計算数理工学論文集, 9巻, 43-48, 2009, 査読有.
- ② N. Ohno, D. Okumura, T. Shibata, Grain-size dependent yield behavior under loading, unloading and reverse loading, International

Journal of Modern Physics B, Vol. 22, 2008, 5937-5942, referred.

- ③ N. Ohno, D. Okumura, Grain size dependence of yield stress due to strain energy of geometrically necessary dislocations, Key Engineering Materials, Vols. 345-346, 2007, 3-8, referred.
- ④ N. Ohno, D. Okumura, Higher-order stress and grain size effects due to self-energy of geometrically necessary dislocations, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Vol. 55, 2007, 1879-1898, refereed.

[学会発表] (計10件)

- ① R. Kametani, K. Koderu, D. Okumura, N. Ohno, Implicit iterative finite element scheme for strain gradient crystal elasticity model based on self-energy of GNDs, 2010 M&M International Symposium for Young Researchers, March 1-3, 2010, California Institute of Technology, Pasadena, USA.
- ② 小寺一輝, 亀谷隆真, 奥村 大, 大野信忠, 幾何学的に必要な転位の自己エネルギーを考慮したひずみこう配結晶塑性理論のための有限要素定式化, 計算数理工学シンポジウム2009, 2009年12月11日, 京大会館.
- ③ 亀谷 隆真, 奥村 大, 大野信忠, 陰解法に基づく多結晶銅薄膜のひずみこう配結晶塑性解析, 日本機械学会第21回計算力学講演会, 琉球大学, 2008年11月1-3日.
- ④ N. Ohno, Grain-size dependent yield behavior of polycrystals at sub-micron and micron scales, 9th Asia-Pacific Symposium on Engineering Plasticity and Its Applications, October 20-24, 2008, Daejeon, Korea, (Plenary Lecture).
- ⑤ N. Ohno, T. Shibata, D. Okumura, Grain-size dependent yield behavior of polycrystals at sub-micron and micron scales, 2nd International Conference on Heterogeneous Materials Mechanics, May 3-8, 2008, Huangshan, China, (Keynote Lecture).
- ⑥ 亀谷隆真, 奥村 大, 大野信忠, ひずみこう配結晶塑性理論を用いた薄膜の曲げ降伏挙動の解析, 日本機械学会東海支部第57期総会・講演会, 2008年3月10-11日, 名古屋大学.
- ⑦ 柴田智行, 奥村 大, 大野信忠, GN 転位の自己エネルギーによる多結晶塑性の寸法依存性, 日本機械学会東海支部第57期総会・講演会, 2008年3月10-11日, 名古屋大学.
- ⑧ N. Ohno, D. Okumura, Strain gradient effects due to self-energy of geometrically necessary dislocations, 14th International Symposium

on Plasticity and Its Current Applications, January 3-8, 2008, Kona, Hawaii, USA, (Keynote Lecture).

- ⑨ 大野信忠, 奥村 大, 転位の自己エネルギーを考慮したサイズ依存現象の解析, 第51回日本学術会議材料工学連合講演会, 2007年11月27-29日, 京大会館, (招待講演).
- ⑩ N. Ohno, Strain gradient effects due to self-energy of geometrically necessary dislocations, International Workshop on Fracture, Plasticity, Micro- and Nano-mechanics in Honoring Prof. K.C. Hwang's 80th Anniversary, August 25, 2007, Tsinghua University, Beijing, China, (Invited Lecture).

[その他]  
ホームページ等

<http://www.mech.nagoya-u.ac.jp/mml/research/research.htm>

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

大野 信忠 (OHNO NOBUTADA)  
名古屋大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号：30115539

##### (2) 研究分担者

奥村 大 (OKUMURA DAI)  
名古屋大学・大学院工学研究科・講師  
研究者番号：70362283